PROTOCOLO PARA TESTES DE COERÊNCIA: VERSÃO 1.0

Carlos Henrique Marchi
UFPR
Curitiba, 6 de fevereiro de 2007.

O objetivo deste protocolo é padronizar o processo de Verificação de soluções numéricas, no âmbito do grupo de pesquisa em CFD da UFPR, para realizar testes de coerência envolvendo erros de iteração e de discretização.

Naquilo que for pertinente, deve-se seguir também o "Protocolo para estimar erros de discretização em CFD: versão 1.1", de setembro de 2005.

Havendo mais de uma variável dependente, deve-se aplicar o procedimento a cada uma delas separadamente.

Este protocolo aplica-se a:

(a) Problemas unidimensionais com malhas de qualquer tipo que sejam refinadas de modo uniforme.
(b) Problemas multidimensionais com malhas de qualquer tipo que sejam refinadas de modo uniforme e com refino simultâneo em todas as dimensões.
(c) Problemas cuja solução analítica (Φ) do modelo matemático é conhecida.
(d) Problemas cuja solução exata do sistema de equações ($\phi_{n\to\infty}$) é ou não conhecida.
(e) Problemas com uma ou mais variáveis dependentes de campo.

1. DETERMINAÇÃO DA MAIOR MALHA A USAR

Após definir-se qual o computador que será utilizado nas simulações, deve-se realizar a simulação do problema na maior malha possível (determinada por tentativa), sem precisar de memória virtual, até atingir o erro de máquina (E_π) sobre a norma l_1 média da variável de campo, ou seja,

$$\bar{l}_1(\phi)_n = \frac{\sum_{i=1}^{N} |\phi_i|_n}{N} \qquad (1)$$

onde n = número da iteração, N = número de nós do sistema de equações da variável dependente (ϕ) e i = número de um nó específico.

Nesta etapa, deve-se anotar: o número de nós da maior malha; o maior valor da memória RAM empregada; o número de iterações externas realizadas; o tempo de CPU; os valores mínimo e máximo de $\bar{l}_1(\phi)_n$ após atingir o erro de máquina; o número de algarismos significativos de ϕ sem erro de máquina (sem variar com as iterações).

Ao final da simulação na maior malha, deve-se gravar a solução de ϕ e considerá-la como a solução "exata" do sistema de equações, isto é, $\phi_{n\to\infty}$. Se disponível, esta solução numérica deve ser substituída pela solução exata verdadeira do sistema de equações.

2. DETERMINAÇÃO DO ERRO DE MÁQUINA

Refazer a simulação na maior malha mas agora iterando-se até atingir o erro de máquina para a norma l_1 média sobre o erro de iteração (E_n), isto é,

$$\bar{l}_1[E_n(\phi)]_n = \frac{\sum_{i=1}^{N} \left|(\phi_{n\to\infty} - \phi_n)_i\right|}{N} \tag{2}$$

Nesta etapa, devem ser obtidos os valores mínimo e máximo de $\bar{l}_1[E_n(\phi)]_n$ após atingir o erro de máquina, denotado-se o máximo por $\bar{l}_1[E_n(\phi)]_n^{Max}$.

3. DEFINIÇÃO DA TOLERÂNCIA

O valor mínimo da tolerância (*Tol*) a empregar nas simulações em todas as malhas, em princípio, deverá ser pelo menos uma ordem de grandeza maior do que $\bar{l}_1[E_n(\phi)]_n^{Max}$, arredondando-se para cima. Por exemplo, se $\bar{l}_1[E_n(\phi)]_n^{Max}$ = 2,3x10^{-13}, o valor mínimo a empregar para a tolerância será Tol = 2,3x10^{-12}, que arredondado resulta em Tol = 1x10^{-11}.

4. CÁLCULO DO ERRO DE DISCRETIZAÇÃO NA MAIOR MALHA

Para a maior malha, realizar novamente a simulação e obter a solução que satisfaça o valor especificado para a tolerância (*Tol*) sobre o erro de iteração (E_n) e calcular a norma l_1 média do erro de discretização (E_h), isto é,

$$\bar{l}_1[E_h(\phi)]_{Tol} = \frac{\sum_{i=1}^{N} \left|(\Phi - \phi_{Tol})_i\right|}{N} \tag{3}$$

5. CÁLCULO DA SOLUÇÃO "EXATA" NAS MALHAS MENORES

Para cada malha mais grossa, realizar a simulação do problema até atingir o erro de máquina (E_π) sobre a norma l_1 média da variável de campo, calculada conforme a Eq. (1).

Nesta etapa, para cada malha, deve-se anotar: o número de nós da malha; o maior valor da memória RAM empregada; o número de iterações externas realizadas; o tempo de CPU; os valores mínimo e máximo de $\bar{l}_1(\phi)_n$ após atingir o erro de máquina; o número de algarismos significativos de ϕ sem erro de máquina (sem variar com as iterações).

Ao final da simulação em cada malha, deve-se gravar a solução de ϕ e considerá-la como a solução "exata" do sistema de equações, isto é, $\phi_{n\to\infty}$. Se disponível, esta solução numérica deve ser substituída pela solução exata verdadeira do sistema de equações.

6. CÁLCULO DO ERRO DE DISCRETIZAÇÃO NAS MALHAS MENORES

Para cada malha mais grossa, realizar novamente a simulação e obter a solução que satisfaça o valor especificado para a tolerância (*Tol*) sobre o erro de iteração (E_n) e calcular a norma l_1 média do erro de discretização (E_h), calculada conforme a Eq. (3).

7. ORDEM EFETIVA

Calcular a ordem efetiva (p_E) do erro de discretização verdadeiro em cada malha h_1 (fina) através de

$$p_E(h_1) = \frac{\log\left[\frac{E_h(\phi_2)}{E_h(\phi_1)}\right]}{\log(r_{21})} \tag{4}$$

onde $E_h(\phi_1)$ e $E_h(\phi_2)$ representam o erro de discretização verdadeiro das soluções numéricas ϕ_1 e ϕ_2, obtidas respectivamente com duas malhas diferentes, h_1 = fina e h_2 = grossa.

A métrica (h) que representa cada malha pode ser obtida através de

$$h = \left(\frac{D}{M}\right)^{\frac{1}{d}} \tag{5}$$

onde D representa o valor do domínio discreto de cálculo do problema (ele corresponde ao comprimento, à área ou ao volume discreto do domínio de cálculo respectivamente para problemas uni, bi ou tridimensionais); d representa a dimensão do problema (ele vale 1, 2 ou 3 respectivamente para problemas uni, bi ou tridimensionais); e M é o número total de elementos ou volumes de controle reais que discretizam o domínio espacial de cálculo.

A razão de refino (r_{21}) entre uma malha fina (h_1) e uma malha grossa (h_2) é definida por

$$r_{21} = \frac{h_2}{h_1} \tag{6}$$

Fazer uma tabela e gráfico com $p_E(h_1)$ em função de h_1 para verificar se a ordem efetiva tende ao valor da ordem assintótica (p_L) (valor teórico) à medida que a malha é refinada, isto é, quando $h_1 \to 0$. O gráfico deve ser com h_1 (log) nas abscissas e $p_E(h_1)$ (decimal) nas ordenadas.

Fazer um gráfico logxlog com h_1 nas abscissas e $\bar{l}_1[E_h(\phi)]_{Tol}$ nas ordenadas.